

EREDMÉNYEK,

2002 január 1 – 2006 december 31.

A pályázat támogatásával végzett kutatások legnagyobb része nemzetközi együttműködések keretében készült. Ennek nagy előnye volt, hogy munkánkban a szerény, hazai lehetőségeinket lényegesen meghaladó támogatást realizálhattunk. Bizonyos értelemben hátrány volt azonban, hogy nem teljesen szuverén módon döntöttünk a kutatás irányának részleteiben. Emiatt a mintegy hat évvel ezelőtt vázolt célkitűzéseinket már ezek miatt sem tudtuk pont-ról pontra követni. A pályázatban rögzített kutatás főiránya azonban változatlan maradt, és meggyőződésünk, hogy a változások eredője nyereséges volt.

Alapkutatások esetében egyébként is lényeges, hogy ne a valamikor kitűzött cél változatlan követését tartsuk célnak, hanem az érdeklődés középpontjában álló témánál a cél rugalmas alakítása mellett haladjunk előre.

Az összes publikációink száma, amin a T037991 szám helyesen szerepel, lényegesen meghaladja a táblázatban felsoroltakat, ahol az újabb irányelvnek megfelelően csak a leglényegesebbeknek ítélt publikációinkat soroltuk fel. A konferencia előadásainkat és a konferenciaanyagokban megjelent publikációinkat is lényegesnek tartjuk megemlíteni, ezért a 17 előadásunkat a beszámoló szöveges részében soroljuk fel. Eredményeinket a pályázatunkban követett tématerületi felsorolásnak megfelelően csoportosítottuk, és itt szerepeltetjük az egyes témákból tartott konferencia előadásokat, melyek jelentős része proceedingsben is megjelent.

I.Egzotikus, a stabilitási tartománytól távoli magok

1. A rezonanciákat és nem-rezonáns kontinuumot is tartalmazó Berggren reprezentációban a komplex kontúr variálásával tudjuk szabályozni, hogy mely rezonanciák legyenek benne az egyrészecske bázisban. A számolás végeredménye természetesen nem függhet a kontúr megválasztásától, a konvergencia gyorsasága azonban függ tőle.

Elsőként publikáltunk olyan héjmodell számolást, amiben a kontúr úgy halad, hogy a Berggren-bázis diszkrét elemei között antikötött állapot is szerepelt. Mivel ilyen bázist elsőként (Berggren megelőzve) javasoltunk, (T. Vertse, P. Curutchet, R. J. Liotta, J. Bang, Acta Phys. Hung. 65, 305 (1989).) ezért ezt a bázist *általánosított Berggren bázisnak* nevezzük. Ezzel a bázissal a neutron elhullatási vonal közeli egzotikus atommagok szerkezetét írtuk le, bemutatva ezzel az általánosított Berggren bázis gyakorlati használhatóságát. Ez az egyetlen olyan bázis, amivel külön lehet tanulmányozni az antikötött állapot és a hozzátartozó komplex kontinuum szerepét. A ^{11}Li atommag példáján bemutattuk, hogy az $l = 0$ parciális hullámú komplex kontinuum és az antikötött állapot járuléka nagyok, és destruktív módon interferálnak. Az általánosított Berggren bázisos számolásnál sem a virtuális állapot járuléka, sem a körülötte lévő komplex kontinuumé nem hanyagolható el. Ez ellentétes a keskeny rezonanciák esetével, ahol a rezonancia domináns járuléka mellett a kontúr járulék általában elhagyható. Részben az OTKA támogatásának köszönhetően eredményeinkről több konferencián is beszámolhattunk, ami lényegesen megkönnyítette eredményeink megismertetését.

Az első eredményeinkről Trentóban az ECT*-ben a 2003 jún. 29-júl. 12 között *Recent Advances in the Nuclear Shell Model* címmel rendezett műhelyen beszéltünk, majd az ugyanott szept. 1-6 között rendezett *Critical Stability III* Konferencián adtunk hírt, illetve Lovas Rezső számolt be róluk a

NENS03 "A New Era of Nuclear Structure Physics" Konferencian, nov. 19-22. között Kurokawan, Niigataban, Japánban.

Az első rövid publikációnk a Physics Letters B folyóiratban [8] jelent meg.
Eredményeinket természetesen részletes cikkben is publikáltuk [15].

Az újfajta héjmodell számolásunkat, a kísérletileg eddig még meg nem figyelt 72-Ca egzotikus atommagra is alkalmaztuk és eredményeinket az alábbi nemzetközi konferenciákon propagáltuk:

T. Vertse, R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu, Shell model representation with antibound states, International Conference on Nuclear Physics Large and Small, Morelos, Mexico, 19-22 April, 2004,

R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu, T. Vertse, Complex shell model with antibound states, 8th International Spring Seminar on Nuclear Physics, Paestum, Italy, 23-27 May, 2004.

T. Vertse, R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu, Shell model representation with antibound states analysing exotic nuclei, International Symposium on Exotic Nuclei, EXON 2004, Peterhof, Russia, 5-12 July, 2004.

R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu, T. Vertse, Description of the continuum part of the spectrum by using the complex energy plane, Workshop on Nuclear Forces and Many-Body Problems, Seattle, Washington, USA, 4-8 October, 2004.

2. Ha keskeny egyrészecke-rezonanciákat veszünk bele a bázisba, akkor ezekből van értelme kvázi-részecke rezonanciákat számolni, még az egyszerű BCS közelítésben is. A pairing-tér távolság függésének meghatározását, illetve a gap-egyenletek numerikus megoldását könnyebb a valós kontúr mellett végezni, mint igazi komplex kontúrt használva. A megoldás után komplex kontúra váltva kiszámítjuk az egyrészecke rezonanciáknak megfelelő kvázi-részecke rezonanciákat. Ezt a módszert dolgoztuk ki egy egyszerű modell esetében. A modellt oxigén illetve nikkal izotópokra próbáltuk ki. A kezdeti eredményeket Debrecenben az ENS'05 Konferencián adtuk elő, és a folyóirat cikket a Nucl. Phys. A-ban publikáltuk [7].
3. Régóta tudjuk, hogy az egyes atommagok és a maganyag tulajdonságait makroszkopikus modellekkel is leírhatjuk. A kötési energiákat például a folyadékcsepp modell elég jól leírja, ha figyelembe vesszük a mikroszkopikus leírásból számolt héjkorrekciót. A makroszkopikus energiatagok paramétereinek értékeit rendszerint a magtömegek kísérleti értékeihez illesztik. Mi a szokásos módszert megfordítva a mikroszkopikusan számolt kötési energiákból próbáltuk a makroszkopikus modell paramétereit meghatározni. Az általunk a T17298 sz. OTKA pályázatunkban kidolgozott általánosított Sztrutyinszkij-féle héjkorrekciós módszer használva, szisztematikus számításokat végeztünk a folyadékcsepp-modell paramétereinek mikroszkopikus modellszámítások révén való becslésére. Ebben gömbszimmetrikus magokra végeztünk önkonzisztens Hartree-Fock számításokat különböző Skyrme kölcsönhatásokat, illetve relativisztikus átlagtér közelítést használva. A Coulomb kölcsönhatás elhanyagolása lehetővé tette igen nagy tömegszámú atommagok kötési energiáinak kiszámítását, határesetben a maganyag sikeres numerikus megközelítését. Véges magokra az izovektor energiatagok együtthatói természetesen függtek a számításban használt kölcsönhatástól. Bízató eredmény volt azonban, hogy ezzel szemben az izoskalár energiatagok együtthatói alig függtek a kölcsönhatástól [20].
4. A héjkorrekciós számolásoknál a diszkrét kötött állapotok Dirac-delta függvényeiből álló nívósűrűségek kisimítására alkalmazunk Gauss függvényes simítást. Matematikailag szempontból analógia, ha a világunkat meghatározó fizikai paraméterek diszkrét értékei helyett a végtelen számú univerzumra egy Gauss-eloszlású sokaságot tételezünk fel. E sokaságban a finom-hangolás hatására alakulhatott ki az élet lehetősége pl. a Földön, ami a fizikai állandók paraméterterében egy a kaotikus viselkedés miatti szigetként jelentkezik [23].

5. A proton radioaktivitás elméleti leírása szempontjából fontos a potenciálgáton való áthaladás pontos leírása. Ennek egyik közelítő módszere a Gurvitz féle két-potenciális közelítés (TPA). A két potenciál csak a R szeparációs távolságtól kifelé egyezik meg. Megmutattuk, hogy a R paraméter alkalmas választásával a TPA módszer pontossága lényegesen növelhető, a pontos eredményt természetesen a Gamow-állapot jelenti, melyet numerikusan direkt módon igen pontosan számoltunk [5].
6. A rezonanciák leírására elterjedt komplex skálázásos módszert ütközési jelenség leírására használtuk. E régi módszert voltaképp újra felfedeztük, és a Coulomb-erőt is tartalmazó esetre általánosítottuk, mégpedig úgy, hogy a belső és a külső tartomány kényelmetlen külön kezelését (a „külső skálázást”) kiküszöböltük. A módszer lényege az, hogy a szórást leíró radiális Schrödinger-egyenletben a parciális hullámnak a síkhullámtól származó tagját leválasztjuk, és a tisztán kifutó aszimptotikájú maradék tagra inhomogén differenciálegyenletet vezetünk le, amelynek a forrástagja a síkhullámtag lesz; az inhomogén egyenletet akkor komplex skálázással tetszőleges négyzetesen integrálható bázison megoldhatjuk. A megoldás komplex inhomogén lineáris egyenletrendszerre vezet. A módszert előbb potenciálproblémára próbáltuk ki sikerrel, majd a ${}^3\text{H}(\text{p},\text{n}){}^3\text{He}$ Lane-modellben megmutattuk, hogy csatolt csatornákra is működik [24].
7. A könnyű atommagok alap és első gerjesztett állapotai hullámfüggvényének speciális variációs függvényekkel való meghatározásához egy új egyszerűen programozható formalizmust vezettünk be a könnyű magok héjmodel állapotainak variációs leírására, ami a Kvantum Monte Carlo programok kiinduló hullámfüggvényeként szolgál. Az új formalizmuson alapuló program segítségével ab initio számolásokat hajtottunk végre az $A=9,10$ tömegszámú atommagokra. Az így kapott eredményeinket az [1] cikkben közzétettük, azonban a külföldi társszerzőink elfeledték az OTKA számot a cikkre rátenni.
8. A ${}^{141}\text{Ho}$ volt az első olyan atommag, ahol rezonanciaállapotra épülő rotációs sávot kísérletileg megmértek. A gerjesztett állapotok részecske-rotor leírásából kiderült, hogy ez a mag valószínűleg triaxiális. Ezt a feltevést ellenőriztük számításainkkal, melynek során a felezési időt és az elágazási arányokat határoztuk meg. A kezdeti eredményeinknek jó fogadtatása volt az Olaszországban 2002 júniusában Trentóban tartott nemzetközi konferencián, A. T. Kruppa, W. Nazarewicz: Proton decay of ${}^{141}\text{Ho}$ on effect an gamma vibrational band, Continuum Aspect of the Nuclear Shell Model, ECT*, Trento, Italy, 3-8 June, 2002. valamint a "Procon-2003" c. nemzetközi szimpóziumon:[2-3]
Korábbi vizsgálatok arra utaltak, hogy ${}^{141}\text{Ho}$ spektrumát a részecske-rotor modellben jobban le lehet írni ha a γ -vibrációs szabadsági fokot is figyelembe vesszük. Megvizsgáltuk, hogy mi a hatása a γ vibrációnak a ${}^{141}\text{Ho}$ proton kibocsátással járó bomlására. Az általunk kifejlesztett un. nem-adiabatikus modelt használtuk, azaz a leánymag gerjesztett állapotainak energiáit figyelembe vettük. Feltételeztük továbbá, hogy a leánymag alapállapotú rotációs sávja mellett létezik egy un. γ -vibrációs sáv is. A két sáv csatolása csak úgy lehetséges, ha a proton és a törzs közötti kölcsönhatás nem tengelyszimmetrikus. Elsőként hajtottunk végre olyan nem adiabatikus számolást a proton kibocsátás leírására, amely a magok triaxiálisitását is figyelembe veszi. Mivel a csatolt differenciálegyenlet rendszerben a csatornák szám túl nagy volt, ezért a Gamow-állapot meghatározása helyett új módszert vezettünk be, nevezetesen az R-mátrix formalizmust és a harmonikus oszcillátoros sorfejtést kombináltuk. Ezzel az új az ún. $L2$ módszerek csoportjába sorolható módszerrel sikerült a konvergenciát elérni a számolásokban. A konkrét mag esetére sajnos az derült ki, hogy a γ -vibráció feltételezése nem javítja lényegesen a kísérleti adatokkal való egyezést vagyis, ha a kísérleti eredményeket helyesen akarjuk leírni, akkor a párkölcsönhatás adekvát figyelembe vétele is szükséges [9].
Ebből a témából meghívott előadást tartottunk Mexico-ban egy nemzetközi konferencián. A. T. Kruppa, N. Michel, W. Nazarewicz, Description of weakly bound or unbound nuclear states. Int. Conf. on Nucl. Phys, Large and Small, Cocoyoc, Mexico, 19-22 April 2004.

II. Egzotikus atomok és mezoszkopikus rendszerek

- 1 A Physics Reports folyóiratban korábbi saját vizsgálatainkat, valamint más szerzők eredményeit foglaltunk össze a töltött néhánytest-rendszerek stabilitásáról. Részletesen foglalkozunk három, négy és öt egységnyi töltést tartalmazó kvantummechanikai rendszerekkel. Ezek közé tartoznak az antiprotont tartalmazó egzotikus rendszerek, pl. antihidrogén, protonium és antiprotonos atomok. Összefoglaltuk az ilyen rendszereket leíró kvantummechanikai formalizmust és a számítási módszereket [13].
- 2 Pályázatunkban az általunk korábban kifejlesztett deformált Gauss-bázis alkalmazását terveztük kvantumpettyekben, azonban sikerült egy ennél jóval hatékonyabb bázist kidolgozunk, amely a sok atomból álló rendszer leírására optimális. Az új Lagrange-bázisos módszer másutt is használható, úgyhogy jelentősége a pályázatunkban megfogalmazott feladaton messze túlmutat. Itt a bázisfüggvény egy rácshoz van rögzítve, és minden rácspontban Lagrange-interpolációra van optimalizálva. Az interpoláció diszkretizációs pontjai egy súlyfüggvény által meghatározott Gauss-kvadratúra pontjai. A Lagrange-bázis teljes rendszert alkot, és az elemei analitikus formában vannak adva, térben lokalizáltak és ortonormáltak. Így a numerikus integrálás pontos. E bázisfüggvények kardinális függvények: az i -edik függvény eltűnik minden diszkretizációs pontban, kivéve az i -edik pontot, ahol abszolút maximuma van; mindazonáltal a függvények folytonosak. A kardinalitás következtében a hullámfüggvény valamely rácspont köré centrált báziselemhez tartozó sorfejtési együtthatója, amit variációsán szoktunk meghatározni, nem más, mint magának a hullámfüggvénynek az értéke a rácspontban. Ugyancsak a kardinalitás következménye, hogy a potenciálisenergia-mátrix diagonális. A kinetikus energia mátrixelemei analitikus vagy numerikus integrálással könnyen kiszámolhatók. A számítási munka az atomok számával arányos, amiben lényeges, hogy a Hamilton-mátrixnak nagyon kevés nem nulla eleme van. A rács egy leképezéssel a probléma természetéhez idomítható [12].
- 3 A sokelektron-rendszerek sűrűségfüggvényes leírasmódjára való alkalmazott Lagrange-függvényes közelítés részletes kritikai áttekintését adtuk, számos példával. A néhány legalsó sajátállapotot a Fermi-féle operátorkifejtési módszerrel határoztuk meg, és eredményét összehasonlítottuk a konjugált gradienses módszerével kapottal és az alternatívaként kifejlesztett szuperdobozos módszerrel kapottal is [21].
- 4 Ab initio sűrűségfüggvényes számítások segítségével, a Cu (100) lépcsői mentén képződő (kísérletileg megfigyelt) 1 dimenziós Fe nanodrótok képződését vizsgáltuk. Kísérletileg kimutatták, hogy az ilyen 1 dimenziós atomláncok a Cu(100) felszínén található lépcsők tetején képződnek, de ennek elméleti magyarázata nem volt ismert. A mi számításaink megmutatták, hogy a lépcsőhöz érő vas atomok először beágyazódnak a lépcsőbe a Cu atomok közé, majd az keletkezett vonzó potenciál csapdába ejti az újonnan érkező Fe atomokat, a Cu lépcső tetején [15]. Sajnos az OTKA szám valahogy lemaradt erről a cikkünkről.
- 5 Az antiprotonos hélium metastabil állapotainak nagy pontosságú elméleti és kísérleti vizsgálata az utóbbi évek fizikai alap kutatásának egyik sikertörténete. Korábban is vizsgáltuk az anti-protonos hélium hosszúélettartamú állapotainak Auger-szélességét. Most azonban az Auger szélesség számolásánál a nyitott csatornák mellett számos zárt elektron-csatornát is figyelembe vettünk a csatolt csatornás számolásaink során, s ezáltal elfogadhatóbb Auger elágazási arányokat sikerült kapnunk. Eredményeinket a Belyaev professzor 70. születésnapjára készült ünnepi könyvben publikáltuk [11].
További tisztázandó kérdés volt az antiprotonos héliumon való elektronbefogásnál a különböző végállapotok keletkezésének relatív valószínűsége. Az eddigi klasszikus ill. félklasszikus próbálkozások helyett teljes, minden szabadsági fokot explicite figyelembe vevő kvantummechanikai leírást kerestünk. Kiderült, hogy a Born-közelítés alkalmazhatósága az ilyen alacsony energiákon kétséges.
Révai J., Shevchenko N.V., Primary population of antiprotonic helium states, arXiv:physics/0310153 v1 30 Oct 2003.

Következő lépésként a befogási reakciót adiabatikus közelítésben tárgyaltuk, és ennek során első ízben kaptunk megbízható, realisztikus hullámfüggvényekkel számolt parciális hatáskeresztmetszeteket [21].

- 6 A kvantummechanikai rendszereknek a mágneses terekben való viselkedésének vizsgálata során vetődött fel egy a vizsgálnál jóval általánosabb probléma, amely az optimalizálások témakörébe tartozik. Folytatva az általunk javasolt új optimalizációs módszer, a hiszterézises optimalizáció fejlesztését, megmutattuk, hogy az algoritmus nem csak rendezetlen mágneses rendszerek alapállapotának keresésére, hanem optimalizációs problémák egy sokkal szélesebb körére alkalmazható, ha a külső mágneses tér fogalmát alkalmas módon kiterjesztjük. Az általánosított algoritmus működőképességét egy standard optimalizációs feladat, az utazó ügynök problémájára mutattuk be [4]. Felkérésre könyvfejezetet írtunk a hiszterézises optimalizációról [10].

A témáról előadást tartottunk a Dagstuhl Seminar, New Optimization Algorithms in Physics (Wadern, Németország, 2003.09.14-19) című rendezvényen. A 18th Max Born Symposium, Physics: Statistical Physics Outside Pure Physics (Ladek Zdroj, Lengyelország, 2003.09.22-25) rendezvényen pedig poszttert mutattunk be.

Az új módszer a legkézenfekvőbb módon, rendezetlen mágneses rendszerek (pl. spinűvegek) alapállapotának keresésére használható. Megmutattuk, hogy a külső tér lassú változtatása helyett annak gyors ki-be kapcsolgatása sok esetben sokkal hatékonyabb módszert eredményez. Ezzel a korábbinál egyszerűbb módot találtunk a módszer alkalmazására optimalizációs problémák egy szélesebb körére [18].

Az algoritmus nagy konnektivitású spin-rendszerek (Sherrington-Kirkpatrick-féle spinűvegek) alapállapotának keresésére igen alkalmas. Jelenleg ez tűnik a leghatékonyabb módszernek. Kiterjedt számításokat végeztünk nagyméretű rendszerek alapállapotú energiaeioszlásainak tanulmányozására [19]. Az eredményeket az indiai Bangalore-ban rendezett konferencián is bemutattuk:

K. F. Pál, Optimization with hysteresis, 22nd International Conference on Statistical Physics of the International Union of Pure and Applied Physics. További előadás:

K. F. Pál, Hysteric optimization, 3rd Next Sigma-Phi. Int. Conf. on News, Expectations and Trends in Statistical Physics, Kolymbari, Greece, 13-18 Aug, 2005.